

# CONDICIONES DE CONTORNO NO REFLECTANTES PARA DINÁMICA DE DEFECTOS EN NANOCRISTALES

Ana Carpio<sup>1\*</sup>, Bárbara Tapiador<sup>1</sup>

1: Departamento de Matemática Aplicada

Facultad de Matemáticas

Universidad Complutense de Madrid

Avda Complutense s/n, Madrid 28040

e-mail: ana\_carpio,btapiador@mat.ucm.es, web: <http://www.mat.ucm.es/~acarpio>

**Palavras chave:** condiciones de contorno no reflectantes, dinámica molecular, elasticidad discreta, funciones de Green, estabilidad

**Resumo.** *La simulación efectiva de la dinámica de defectos en nanocristales requiere acoplar modelos atómicos no lineales en las zonas de concentración de defectos con descripciones linealizadas del resto del cristal. Expresando la dinámica exterior en términos de funciones de Green, obtenemos condiciones que evitan reflexiones espúreas en las fronteras artificiales. Pueden usarse para generar condiciones de transmisión con el fin de acoplar dos regiones con dinámicas distintas, o bien como condiciones de contorno artificiales que permiten truncar el recinto computacional.*

## 1 INTRODUCCIÓN

Las simulaciones de dinámica molecular se han convertido en una herramienta esencial para investigar los procesos que ocurren a escala atómica en los sólidos cristalinos. No obstante, su elevado coste obliga a desarrollar estrategias para reducir el tamaño de los recintos computacionales sin alterar excesivamente los resultados de la simulación.

Consideremos por ejemplo un nanocristal en el cual defectos y dislocaciones están concentrados en una pequeña región. Tal es el caso en los experimentos de nanoindentación, en los cuales las dislocaciones se acumulan en torno a la punta del indentador. Parece razonable truncar el recinto computacional a una cierta distancia del indentador. Dentro del recinto, se lleva a cabo una simulación de dinámica molecular en la que se tiene en cuenta el medio circundante de forma adecuada. Es frecuente el recurso a condiciones de contorno periódicas, que sólo tienen sentido en las direcciones perpendiculares a la dirección de indentación y que en realidad implican que se está simulando una colección de indentaciones espaciadas periódicamente, que ocurren simultáneamente. En la dirección en la que avanza el indentador estas condiciones carecen de sentido.

En la práctica, resulta conveniente colocar la frontera artificial suficientemente lejos de los defectos como para que las ecuaciones de movimiento se puedan linealizar, reemplazando así la dinámica atómica no lineal elegida por un problema de elasticidad discreta. En esta frontera se puede optar por imponer una condición de contorno artificial que reproduzca adecuadamente la respuesta del medio exterior o por acoplar la simulación de dinámica molecular con métodos sin malla o elementos finitos. En ambos casos, las condiciones de contorno o de transmisión impuestas han de minimizar las reflexiones espúreas de ondas elásticas hacia el interior del recinto computacional que se producen por un cambio brusco en la descripción del sistema en la frontera o interfaz artificial. La Figura 1 compara la evolución de una onda en una red con los resultados obtenidos al truncar el recinto computacional e imponer distintos tipos de condiciones de contorno. Tales reflexiones se han observado en estudios atomísticos de dinámica de dislocaciones [1] o fisuras [2] y al diseñar esquemas multiescala híbridos [3].

El problema de suprimir reflexiones en fronteras artificiales se presenta en multitud de campos distintos. En las últimas décadas, se ha producido un progreso notable en problemas de propagación de ondas en medios continuos (elásticas, acústicas o electromagnéticas). Si la dinámica ondulatoria se genera por completo dentro del recinto computacional y fuera de él no hay mecanismos que puedan causar reflexiones hacia su interior, entonces la solución cerca de la frontera está compuesta únicamente por ondas salientes: la condición de contorno artificial ha de generar una radiación de energía que sale del recinto. Se recurre a tres tipos. Las condiciones de contorno transparentes son exactas, con lo que el problema truncado es en principio equivalente al de partida. Normalmente involucran integrales en tiempo y espacio, por lo que resultan costosas y en la práctica son difíciles de implementar sin generar inestabilidades a tiempos largos [4, 5, 6]. Modificando convenientemente los núcleos integrales, se obtienen condiciones locales aproximadas. No

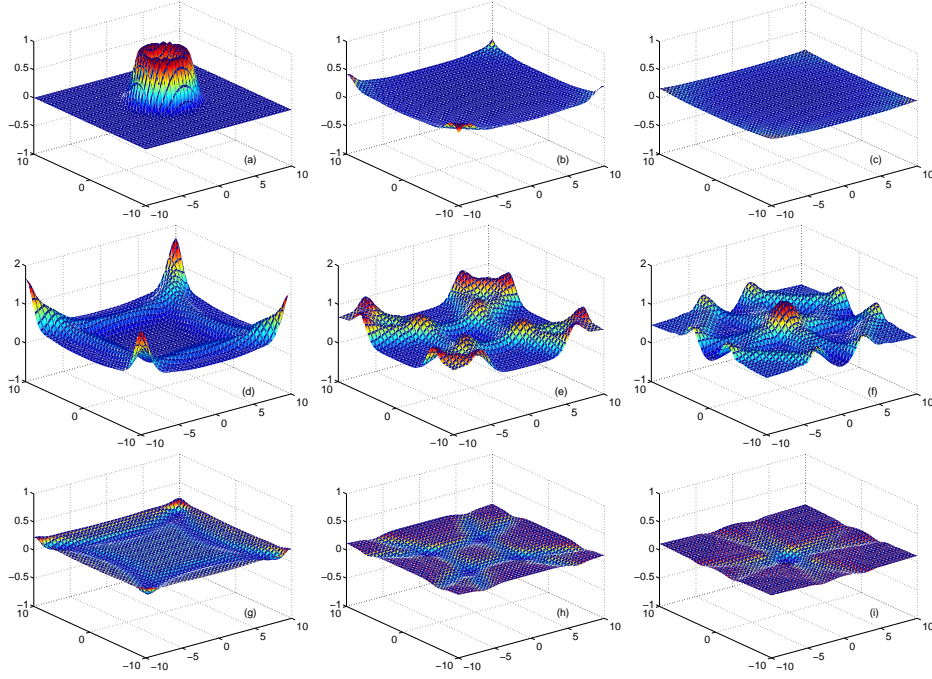


Figura 1: (a) Onda saliente y (b),(c) aspecto de la región a la cual se va a restringir la computación una vez ha salido esta onda. Detalle de la evolución de la onda (a) al llegar a las paredes del recinto computacional: (d),(e),(f) con condiciones periódicas y (g),(h),(i) con condiciones absorbentes de orden bajo.

todas las aproximaciones son válidas y hay que seleccionar cuidadosamente aquellas que dan lugar a problemas bien puestos, evitando que el sistema se desestabilice a tiempos largos [4, 7, 8]. Se denominan condiciones de contorno absorbentes. La tercera posibilidad consiste en introducir una capa perfectamente acoplada fuera del recinto computacional que amortigua las ondas generadas en el borde sin que lleguen a rebotar hacia el interior. La idea funciona satisfactoriamente en electromagnetismo [9] y se ha extendido a problemas de fluidos y elasticidad [10]. Todas las condiciones de contorno propuestas para problemas continuos han de ser discretizadas de forma que no se amplifiquen las reflexiones al discretizar dado que las leyes de dispersión del problema discreto y el continuo son distintas. En casos particulares se han derivado condiciones no reflectantes directamente para problemas discretizados [11, 12].

Al truncar dominios en simulaciones de dinámica molecular, no sólo es preciso dejar salir las ondas, sino que se ha de incorporar la respuesta del medio exterior ya que los campos elásticos de los defectos decaen muy lentamente y no se pueden considerar nulos en las fronteras. En [13] se han introducido condiciones dependientes del tiempo que acoplan simulaciones atomísticas con una descripción lineal del entorno circundante. La respuesta del medio exterior se reproduce mediante una ecuación de Langevin generalizada [14] que promedia las velocidades medidas en el recinto computacional con un núcleo de

convolución. La integral involucra un núcleo que se calcula llevando a cabo una simulación de dinámica molecular en un recinto más grande. Otros intentos de minimizar reflexiones incorporan términos de fricción ad hoc [15], se basan en acoplamientos aproximados [16] o recurren a estrategias de optimización [17].

En este artículo obtenemos condiciones de contorno para simulaciones atomísticas usando funciones de Green de problemas de elasticidad lineal discreta asociados. Tales condiciones son no locales en tiempo y resultan ser exactas para el problema lineal. Discretizándolas convenientemente obtenemos una aproximación absorbente. Discutimos su efectividad y las aplicamos al estudio de la evolución de grupos de dislocaciones en arista.

El artículo está organizado como sigue. En la Sección 2 obtenemos las condiciones de contorno exactas en un retículo unidimensional y llevamos a cabo diversos tests numéricos. La Sección 3 extiende la idea a cristales bi y tridimensionales. La posibilidad de obtener capas perfectamente acopladas se comenta en la Sección 4. La Sección 5 resume las conclusiones de este estudio y las perspectivas de trabajo futuro.

## 2 CONDICIONES DE CONTORNO EXACTAS EN DIMENSION UNO

Consideramos una cadena atómica regida por la dinámica

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = V'(u_{n+1} - u_n) - V'(u_n - u_{n-1}), \quad n \in \mathbb{N} \quad (1)$$

donde  $u_n$  representa el desplazamiento del átomo  $n$ -ésimo con respecto a su posición de equilibrio.  $M > 0$  es la masa atómica y  $V$  el potencial interatómico. Suponemos que los posibles defectos están concentrados en la región  $|n| \ll N$ . Cuando  $n$  está próximo a  $N$ , podemos linealizar las ecuaciones de movimiento reemplazando (1) por:

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = K(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), \quad K > 0, n \in \mathbb{N}. \quad (2)$$

Colocamos una frontera artificial en  $|n| = N$  y buscamos una condición de contorno exacta para (2). Esto significa que resolver el problema en la cadena truncada  $|n| \leq N$  con esa condición de contorno produce el mismo resultado que resolver el problema completo (2). Si se utilizan estas condiciones para el problema no lineal (1), dejan de ser exactas debido a la linealización, pero se espera que funcionen razonablemente. La primera etapa a la hora de derivar estas condiciones de contorno consiste en calcular la función de Green del problema linealizado. Gracias a ella podemos expresar la contribución de la región suprimida sobre el recinto computacional como una fuerza ejercida sobre la frontera.

### 2.1 Funciones de Green

Se trata de dar una representación integral de la solución del problema:

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = D(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + f_n, \quad n \in \mathbb{N} \quad (3)$$

$$u_n(0) = u_n^0, \quad \frac{du_n}{dt}(0) = u_n^1, \quad (4)$$

donde  $D = \frac{K}{M} > 0$ . Para ello se procede como sigue. En primer lugar, se elimina el operador en diferencias introduciendo funciones generatrices  $p(\theta, t)$  y  $f(\theta, t)$ :

$$p(\theta, t) = \sum_n u_n(t) e^{-in\theta}, \quad f(\theta, t) = \sum_n f_n(t) e^{-in\theta}. \quad (5)$$

Derivando  $p$  respecto a  $t$  y usando la ecuación (3), vemos que  $p$  es solución de la ecuación diferencial ordinaria:

$$\frac{d^2 p}{dt^2}(\theta, t) + \omega(\theta)^2 p(\theta, t) = f(\theta, t) \quad (6)$$

donde  $\omega(\theta)^2 = 4D \sin^2(\frac{\theta}{2})$ , con las condiciones iniciales obvias para  $p(\theta, t)$ , obtenidas a partir de las condiciones iniciales para  $u_n(t)$ . La solución  $p$  depende de las raíces del polinomio  $r^2 + \omega(\theta)^2 = 0$ :

$$\begin{aligned} p(\theta, t) &= p(\theta, 0) \cos(\omega(\theta)t) + \frac{dp}{dt}(\theta, 0) \frac{\sin(\omega(\theta)t)}{\omega(\theta)} \\ &\quad + \int_0^t \frac{\sin(\omega(\theta)(t-s))}{\omega(\theta)} f(\theta, s) ds \end{aligned} \quad (7)$$

y la solución  $u_n(t)$  de (3) se recupera invirtiendo la transformada de Fourier (5):

$$u_n(t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{in\theta} p(\theta, t), \quad (8)$$

que podemos reescribir como:

$$u_n(t) = \sum_{n'} [G_{n,n'}^0(t) \frac{du_{n'}}{dt}(0) + \frac{dG_{n,n'}^0}{dt}(t) u_{n'}(0)] + \int_0^t \sum_{n'} G_{n,n'}^0(t-s) f_{n'}(s) ds \quad (9)$$

donde

$$G_{n,n'}^0(t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{e^{i(n-n')\theta}}{\omega(\theta)} \sin(\omega(\theta)t). \quad (10)$$

Las funciones de Green para cadenas atómicas fueron calculadas por Schrödinger en [18]. Sus propiedades se analizan en detalle en [19]. La convergencia de sumas en (10) se deduce del decaimiento espacial de las funciones de Green. Integrando por partes en (10) y usando la periodicidad de  $e^{i(n-n')\theta}$  concluimos que  $G_{n,n'}^0$  decae como  $|n-n'|^p$  para cualquier  $p > 1$ . Como  $\omega(\theta)$  es par respecto a  $\theta$ , la función de Green (10) es real.

## 2.2 Condiciones de contorno

Consideremos en primer lugar la geometría más simple. Colocamos una frontera artificial en  $n = 0$  y restringimos el recinto computacional a la región  $n \geq 0$ . Necesitamos una condición de contorno para calcular  $u_0(t)$  y cerrar el sistema (3). En principio,

$$\frac{d^2 u_0}{dt^2} = D(u_1 - 2u_0 + u_{-1}) + f_0, \quad (11)$$

pero  $u_{-1}(t)$  es desconocido a no ser que se resuelva (3)-(4) para  $n \leq 0$ . Reescribimos (3) en  $n = -1$  como:

$$\frac{d^2 u_{-1}}{dt^2} = D(0 - 2u_{-1} + u_{-2}) + f_{-1} + Du_0. \quad (12)$$

Suponiendo  $u_0(t)$  conocido, el problema (3)-(4) para  $n \leq 0$  con condición de contorno  $u_0(t)$  puede reformularse como un problema con condición de contorno nula en la pared y término fuente modificado:  $f_n + D\delta_{n,-1}u_0$ ,  $n < 0$ . Podemos extender este problema a todo el espacio definiendo

$$v_n = \begin{cases} u_n & n < 0 \\ 0 & n = 0 \\ -u_{-n} & n > 0. \end{cases} \quad (13)$$

La extensión  $v_n$  satisface

$$\frac{d^2 v_n}{dt^2} = D(v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1}) + g_n, \quad (14)$$

$$v_n(0) = v_n^0, \quad \frac{dv_n}{dt}(0) = v_n^1, \quad (15)$$

para todo  $n$ , siendo  $v_n^0$  y  $v_n^1$  extensiones impares de  $u_n^0$  y  $u_n^1$  definidas como en (13). La fuente  $g_n$  se obtiene extendiendo  $f_n + D\delta_{n,-1}u_0$  de la misma forma. Hemos incluido la condición de contorno  $u_0$  como una fuerza que actúa sobre  $u_{-1}$  con el fin de posibilitar la extensión impar con  $v_0 = 0$ . Usando la expresión integral (9) y la simetría de los datos obtenemos para  $n < 0$

$$\begin{aligned} u_n(t) &= v_n(t) = \sum_{n' \leq 0} [\mathcal{G}_{n,n'}^0(t) \frac{du_{n'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{n,n'}^0}{dt}(t) u_{n'}(0)] \\ &\quad + \int_0^t \sum_{n' \leq 0} \mathcal{G}_{n,n'}^0(t-s) (f_{n'}(s) + D\delta_{n',-1}u_0(s)) ds, \end{aligned} \quad (16)$$

donde  $\mathcal{G}_{n,n'}^0 = G_{n,n'}^0 - G_{n,-n'}^0$  es la función de Green para el semiespacio  $n < 0$  con condición de contorno nula en  $n = 0$ . De esta forma, obtenemos una expresión cerrada para  $u_{-1}$ :

$$\begin{aligned} u_{-1}(t) &= r_{-1}(t) + D \int_0^t \mathcal{G}_{-1,-1}^0(t-s) u_0(s) ds, \\ r_{-1}(t) &= \sum_{n' \leq 0} [\mathcal{G}_{-1,n'}^0(t) \frac{du_{n'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{-1,n'}^0}{dt}(t) u_{n'}(0) \\ &\quad + \int_0^t \mathcal{G}_{-1,n'}^0(t-s) f_{n'}(s) ds]. \end{aligned} \quad (17)$$

El término  $r_{-1}(t)$  representa la contribución de la región exterior suprimida a la evolución en el recinto computacional  $n \geq 0$ . La condición de contorno en  $n = 0$  toma la forma:

$$\frac{d^2 u_0}{dt^2} = D \left( u_1 - 2u_0 + D \int_0^t \mathcal{G}_{-1,-1}^0(t-s) u_0(s) ds \right) + Dr_{-1} + f_0, \quad (18)$$

con núcleo de integración

$$\mathcal{G}_{-1-1}^0(t) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{1 - e^{-2i\theta}}{\omega(\theta)} \sin(\omega(\theta)t). \quad (19)$$

Combinando este argumento en dos paredes opuestas obtenemos condiciones no reflejantes para recintos truncados con fronteras artificiales en  $n = \pm N$

$$\frac{d^2 u_{\pm N}}{dt^2} = D \left( u_{\pm(N-1)} - 2u_{\pm N} + D \int_0^t \mathcal{G}_{-1-1}^0(t-s) u_{\pm N}(s) ds \right) + Dr_{\pm(N+1)} + f_{\pm N}, \quad (20)$$

usando

$$\begin{aligned} u_{-N-1}(t) &= r_{-N-1}(t) + \int_0^t \mathcal{G}_{-1,-1}^0(t-s) u_{-N}(s) ds, \\ r_{-N-1}(t) &= \sum_{n' \leq -N} [\mathcal{G}_{-1,n'+N}^0(t) \frac{du_{n'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{-1,n'+N}^0}{dt}(t) u_{n'}(0) \\ &\quad + \int_0^t \mathcal{G}_{-1,n'+N}^0(t-s) f_{n'}(s) ds], \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} u_{N+1}(t) &= r_{N+1}(t) + \int_0^t \mathcal{G}_{1,1}^0(t-s) u_N(s) ds, \\ r_{N+1}(t) &= \sum_{n' \geq N} [\mathcal{G}_{1,n'-N}^0(t) \frac{du_{n'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{1,n'-N}^0}{dt}(t) u_{n'}(0) \\ &\quad + \int_0^t \mathcal{G}_{1,n'-N}^0(t-s) f_{n'}(s) ds]. \end{aligned} \quad (22)$$

### Observaciones:

- No se asume que los datos iniciales y la fuente tengan soporte compacto contenido en el interior del recinto truncado. La serie se puede calcular usando el decaimiento de  $G_{1k}^0$  con  $k$ .
- Cuando el soporte de los datos iniciales y la fuente están contenidos en el recinto computacional  $r_{\pm(N+1)}(t) = 0$  y la condición de contorno involucra únicamente a  $u_{\pm N}$  y su vecino interior inmediato. La condición es no local en tiempo debido a la integral.
- Los términos  $r_{\pm(N+1)}(t)$  representan la interacción con el medio externo. Se pueden reemplazar por la solución de un problema exterior calculada mediante métodos sin malla o de elementos finitos si se desea evitar el cálculo de la serie y las integrales correspondientes, lo cual puede ser ventajoso en dimensiones superiores. De esta forma se tiene un método híbrido multiescala que acopla el problema atómico con una descripción exterior continua discretizada.
- Frecuentemente se introducen términos de fricción  $\frac{\partial u_{\pm N}}{\partial t}$  en las ecuaciones diferenciales para los extremos de la cadena esperando reducir las reflexiones producidas por elecciones arbitrarias de las condiciones de contorno, con un éxito incierto. Al discretizar estas derivadas en tiempo, se obtienen combinaciones lineales de valores de  $u_{\pm N}$  en tiempos anteriores. La integral que aparece en nuestras condiciones de contorno exactas (20) es una combinación de valores de  $u_{\pm N}$  ya calculados. Se puede interpretar como un término de fricción generado por la cola de la cadena truncada.

### 2.3 Resultados numéricos

La Figura 2 compara la evolución temporal de soluciones de (2) obtenidas utilizando dos recintos encajados, el primero de los cuales triplica en tamaño al segundo. En el primero usamos condiciones de contorno de Dirichlet nulas. El dato inicial es una gaussiana con soporte contenido en el recinto más pequeño y podemos suponer que durante el tiempo en el que se realiza la comparación no hay interacción con el borde exterior, así que la solución es independiente de las condiciones de contorno empleadas. El resultado obtenido se representa con cuadrados negros.

En el segundo recinto utilizamos tres condiciones de contorno. Los triángulos rojos corresponden a la solución obtenida con condiciones de contorno nulas. La onda se refleja hacia el interior del recinto computacional al llegar a la pared, llega al centro y vuelve a salir hacia el exterior, produciéndose reflexiones sucesivas sin que la magnitud de las ondas reflejadas decrezca. Los círculos verdes se obtienen con una versión discretizada de las condiciones de contorno no reflectantes para la ecuación de ondas  $u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0$  :  $u_t \pm cu_x = 0$ . En nuestro caso  $c = 1$  y la condición discretizada a imponer en cada pared es del tipo  $u(t_{j+1}) - u(t_j) = k\sqrt{D}(u_{\pm N}(t_j) - u_{\pm(N-1)}(t_j))$ , tomando  $k$  y  $\frac{1}{\sqrt{D}}$  como pasos en tiempo y espacio respectivamente. De nuevo, una onda reflejada de cierta magnitud rebota de las paredes al interior sucesivamente.

La tercera condición de contorno se obtiene discretizando la condición exacta (20). El resultado se ha representado con asteriscos azules. Es bien sabido que al discretizar ecuaciones integrodiferenciales se pueden generar inestabilidades a tiempos largos y que esta tendencia a la inestabilidad empeora con métodos de orden alto. Se ha discretizado el sistema de ecuaciones con el esquema de Verlet (orden 2, simpléctico) y la integral mediante la regla del trapecio compuesta (orden 2). El núcleo  $\mathcal{G}_{-1,-1}(t-s)$  oscila y decae a medida que  $t-s$  crece. El decaimiento permite truncar la integral a un intervalo de la forma  $[t-\tau, t]$ . La regla del trapecio reemplaza esta la integral por una combinación lineal de valores de  $u_{\pm N}$  de la forma  $h \sum_{j=1}^{n_\tau} \mathcal{G}_{-1,-1}(t_j) u_{\pm N}(t_k - t_j)$  en cada tiempo  $t_k$ . Los pesos  $\mathcal{G}_{-1,-1}(t_j)$ ,  $j = 1 \dots n_\tau$ , son fijos y se calculan una sola vez. Si  $\tau$  es demasiado pequeño, se observa una onda reflejada similar a la obtenida con condiciones de contorno nulas. A medida que  $\tau$  crece, la magnitud de la onda reflejada disminuye. Si  $\tau$  es demasiado grande, el error de discretización acumulado desestabiliza el esquema. En general, es posible encontrar un valor óptimo para  $\tau$  que depende de  $D$  y de  $k$ , de modo que la onda reflejada es menor que con otras condiciones de contorno y termina por desvanecerse.

### 3 EXTENSIÓN A DIMENSIONES SUPERIORES

Consideremos un cristal cúbico simple. Etiquetamos sus átomos usando tres parámetros enteros, que coinciden con sus coordenadas cartesianas  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ . El desplazamiento de cada átomo respecto a su posición de equilibrio es  $\mathbf{u}_{\mathbf{n}}$ . Si denotamos la energía del



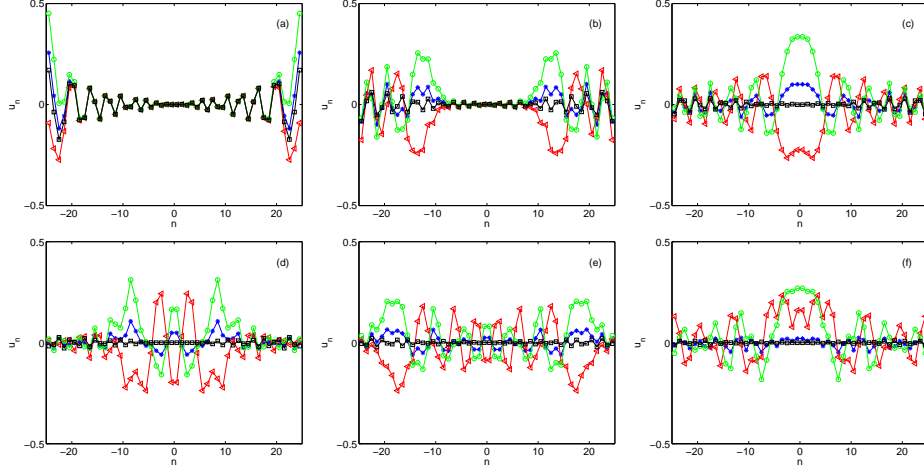


Figura 2: Ondas salientes con condiciones de contorno aproximadas comparada con la onda original para  $\frac{K}{M} = 1$  y  $\tau = 0.8$  en sucesivos instantes de tiempo.

cristal por  $U(\mathbf{u})$ ,  $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_n)$ , las ecuaciones de movimiento son

$$M \frac{d^2 \mathbf{u}_n}{dt^2} = - \frac{\partial U(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}_n} \quad (23)$$

donde  $\mathbf{u}_n$  es el vector desplazamiento del átomo etiquetado como  $n$  y  $M$  es su peso atómico. La energía puede venir expresada como una suma de potenciales interatómicos  $U(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}' \neq \mathbf{n}} V(|\mathbf{u}_{\mathbf{n}'} - \mathbf{u}_{\mathbf{n}}|)$ , para algún potencial  $V$  o incluir correcciones ('glue potential', 'embedded atom'). Cuando todos los defectos del cristal se concentran en una región determinada, podemos linealizar y localizar las ecuaciones de movimiento a cierta distancia. Tomando en cuenta únicamente la interacción con los vecinos próximos, las ecuaciones (vectoriales) de movimiento se aproximan por:

$$M \frac{d^2 \mathbf{u}_n}{dt^2} = \sum_{|n_1 - n'_1| \leq 1, |n_2 - n'_2| \leq 1, |n_3 - n'_3| \leq 1} \mathbf{K}_{\mathbf{n} - \mathbf{n}'} \mathbf{u}_{\mathbf{n}'} \quad (24)$$

con matrices coeficiente  $\mathbf{K}_{\mathbf{n} - \mathbf{n}'}$  relacionadas con las constantes elásticas del retículo:

$$\mathbf{K}_{\mathbf{n} - \mathbf{n}'} = - \frac{\partial^2 U(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}_{\mathbf{n}'} \partial \mathbf{u}_{\mathbf{n}}} \Big|_{\mathbf{u} = 0}. \quad (25)$$

### 3.1 Un caso modelo

Consideramos en primer lugar el caso modelo de una ecuación de ondas discreta, en el que las matrices  $\mathbf{K}_{\mathbf{n} - \mathbf{n}'}$  toman una forma particularmente simple

$$\frac{d^2 \mathbf{u}_n}{dt^2} = D \sum_{|\mathbf{n} - \mathbf{n}'| \leq 1} (\mathbf{u}_{\mathbf{n}'} - \mathbf{u}_{\mathbf{n}}) \quad (26)$$

con  $D > 0$ ,  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$  y  $\mathbf{n}' = (n'_1, n'_2, n'_3)$ . Las ecuaciones se desacoplan y podemos trabajar componente a componente con problemas escalares. El resultado vectorial se recupera reagrupando las componentes. Truncamos el dominio computacional a una caja finita, colocando fronteras artificiales en  $\{|n_1| = N_1, |n_2| = N_2, |n_3| = N_3\}$  y buscamos una condición de contorno no reflectante. De nuevo, el primer paso consiste en calcular las funciones de Green del problema de valores iniciales.

### 3.1.1 Funciones de Green

Deseamos hallar una representación integral para la solución del problema

$$\frac{d^2 u_{\mathbf{n}}}{dt^2} = D \sum_{|\mathbf{n}-\mathbf{n}'| \leq 1} (u_{\mathbf{n}'} - u_{\mathbf{n}}) + f_{\mathbf{n}}, \quad (27)$$

$$u_{\mathbf{n}}(0) = u_{\mathbf{n}}^0, \quad \frac{du_{\mathbf{n}}}{dt}(0) = u_{\mathbf{n}}^1. \quad (28)$$

Para encontrar las funciones de Green asociadas, seguimos el procedimiento descrito en la sección 2.1: Se trata de eliminar el operador en diferencias recurriendo a transformadas de Fourier discretas

$$p(\theta, t) = \sum_{\mathbf{n}} u_{\mathbf{n}}(t) e^{-i\mathbf{n} \cdot \theta}, \quad f(\theta, t) = \sum_{\mathbf{n}} f_{\mathbf{n}}(t) e^{-i\mathbf{n} \cdot \theta} \quad (29)$$

donde  $\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ .

Derivando  $p$  respecto a  $t$  y usando la ecuación (28), concluimos que  $p$  es solución de (5) con  $\omega(\theta)^2 = 4D[\sin^2(\frac{\theta_1}{2}) + \sin^2(\frac{\theta_2}{2}) + \sin^2(\frac{\theta_3}{2})]$ . Las condiciones iniciales para  $p(\theta, t)$  se obtienen a partir de las condiciones para  $u_{\mathbf{n}}(t)$ . De nuevo,  $p$  depende de las raíces del polinomio  $r^2 + \omega(\theta)^2 = 0$  y viene dado por (7). Recuperamos  $u_{\mathbf{n}}(t)$  invirtiendo las transformadas de Fourier para obtener la expresión integral (9). Ahora,  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{n}'$  y  $\theta$  son vectores y las funciones de Green toman la forma:

$$G_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'}^0(t) = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{(2\pi)^3} \frac{e^{i(\mathbf{n}-\mathbf{n}') \cdot \theta}}{\omega(\theta)} \sin(\omega(\theta)t). \quad (30)$$

### 3.1.2 Condiciones de contorno

En cada pared de la caja  $\{|n_1| = N_1, |n_2| = N_2, |n_3| = N_3\}$  deseamos imponer una condición de contorno exacta para el semiespacio correspondiente.

Consideremos un semiespacio determinado. Colocamos una frontera artificial en  $n_1 = 0$  y resolvemos (26) para  $n_1 \geq 0$ . Necesitamos una condición de contorno para calcular  $u_{0, \mathbf{m}}(t)$ ,  $\mathbf{m} = (n_2, n_3)$ . En la pared  $n_1 = 0$ , (26) se reduce a:

$$\frac{d^2 u_{0, \mathbf{m}}}{dt^2} = D \sum_{|n'_1| + |\mathbf{m}-\mathbf{m}'| \leq 1} (u_{n'_1, \mathbf{m}'} - u_{0, \mathbf{m}}) + f_{0, \mathbf{m}}, \quad (31)$$

Estas ecuaciones involucran valores en la pared  $n_1 = -1$ , que son desconocidos. Obtenemos una expresión para ellos suponiendo conocidos los valores  $u_{0,\mathbf{m}}$  para todo  $\mathbf{m}$  y resolviendo (27)-(28) en el semiespacio  $n_1 \leq 0$ , usando  $u_{0,\mathbf{m}}$  como datos de contorno. Este problema se puede reescribir como un problema con condiciones de contorno nulas en  $n_1 = 0$  y un término fuente modificado:  $f_{n_1,\mathbf{m}} + D\delta_{n_1,-1}u_{0,\mathbf{m}}$ . Esto permite una extensión impar a todo el espacio:

$$v_{n_1,\mathbf{m}} = \begin{cases} u_{n_1,\mathbf{m}} & n_1 < 0 \\ 0 & n_1 = 0 \\ -u_{-n_1,\mathbf{m}} & n_1 > 0. \end{cases} \quad (32)$$

La extensión  $v_{n_1,\mathbf{m}}$  es solución de:

$$\frac{d^2 v_{n_1,\mathbf{m}}}{dt^2} = D \sum_{|n'_1 - n_1| + |\mathbf{m} - \mathbf{m}'| \leq 1} (v_{n'_1,\mathbf{m}'} - v_{n_1,\mathbf{m}}) + g_{n_1,\mathbf{m}}, \quad (33)$$

$$v_{n_1,\mathbf{m}}(0) = v_{n_1,\mathbf{m}}^0, \quad \frac{dv_{n_1,\mathbf{m}}}{dt}(0) = v_{n_1,\mathbf{m}}^1 \quad (34)$$

para  $n_1, \mathbf{m} = (n_2, n_3)$ . Los datos  $v_{n_1,\mathbf{m}}^0$  y  $v_{n_1,\mathbf{m}}^1$  son extensiones impares de  $u_{n_1,\mathbf{m}}^0$  y  $u_{n_1,\mathbf{m}}^1$  definidas como en (32). La fuente  $g_{n_1,\mathbf{m}}$  se obtiene extendiendo  $f_{n_1,\mathbf{m}} + D\delta_{n_1,-1}u_{0,\mathbf{m}}$  de forma análoga. Usando la representación integral de  $v_{n_1,\mathbf{m}}$  en términos de funciones de Green hallada en 3.1.1 y la simetría de los datos encontramos la expresión buscada para  $u_{-1,\mathbf{m}}$ :

$$u_{-1,\mathbf{m}}(t) = r_{-1,\mathbf{m}}(t) + D \int_0^t \mathcal{G}_{(-1,\mathbf{m}),(-1,\mathbf{m})}^0(t-s)u_{0,\mathbf{m}}(s)ds, \quad (35)$$

$$\begin{aligned} r_{-1,\mathbf{m}}(t) = & \sum_{n'_1 \leq 0, \mathbf{m}' \in \mathbb{Z}^2} \left[ \mathcal{G}_{(-1,\mathbf{m}),(n'_1,\mathbf{m}')}^0(t) \frac{du_{n'_1,\mathbf{m}'}^1}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{(-1,\mathbf{m}),(n'_1,\mathbf{m}')}^0}{dt}(t) u_{n'_1,\mathbf{m}'}^0(0) \right. \\ & \left. + \int_0^t \mathcal{G}_{(-1,\mathbf{m}),(n'_1,\mathbf{m}')}^0(t-s)f_{n'_1,\mathbf{m}'}(s)ds \right] \end{aligned} \quad (36)$$

donde  $\mathcal{G}_{(n_1,\mathbf{m}),(n'_1,\mathbf{m}')}^0 = G_{(n_1,\mathbf{m}),(n'_1,\mathbf{m}')}^0 - G_{(n_1,\mathbf{m}),(-n'_1,\mathbf{m}')}^0$  es la función de Green del semiespacio  $n_1 < 0$  con condición de contorno nula en  $n_1 = 0$ .

El término  $r_{-1,\mathbf{m}}(t)$  representa la contribución de los datos iniciales en la región exterior y su incidencia en la evolución dentro del recinto truncado. La condición de contorno en la pared  $n_1 = 0$  viene dada por (31) y (35). Las condiciones de contorno en otros planos paralelos o en otras direcciones se calculan de forma análoga con modificaciones obvias.

### 3.1.3 Resultados numéricos

Hemos usado estas condiciones de contorno para simular la evolución de un grupo de dislocaciones en arista en cristales cúbicos bidimensionales cuando una de ellas llega a

la pared del recinto computacional. Las dislocaciones en movimiento son como ondas que se desplazan. Al llegar a una pared real del cristal, quedan atrapadas. En una pared artificial, hay que evitar este efecto si no queremos distorsionar la evolución de las dislocaciones que quedan en el interior. Es preciso que las condiciones de contorno dejen salir las dislocaciones que alcanzan los bordes del recinto computacional.

La geometría inicial se describe en la Figura 3. Se aplica una tensión de cizalla y las dislocaciones empiezan a moverse por efecto de esta tensión y de su interacción mutua. Su dinámica se rige por un modelo simplificado de cadenas que interactúan [20, 21]:

$$M \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial t^2} = K_1(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) + K_2(\sin(u_{i,j+1} - u_{i,j}) + \sin(u_{i,j-1} - u_{i,j})), \quad (37)$$

con  $M, K_1, K_2 > 0$ . Nótese que las condiciones (31), (35) se aplican en dos dimensiones sin más que reemplazar  $\mathbf{m} = (n_2, n_3)$  por  $m = n_2$ . El esquema seguido para discretizar el sistema resultante es el descrito en la Sección 2.3.

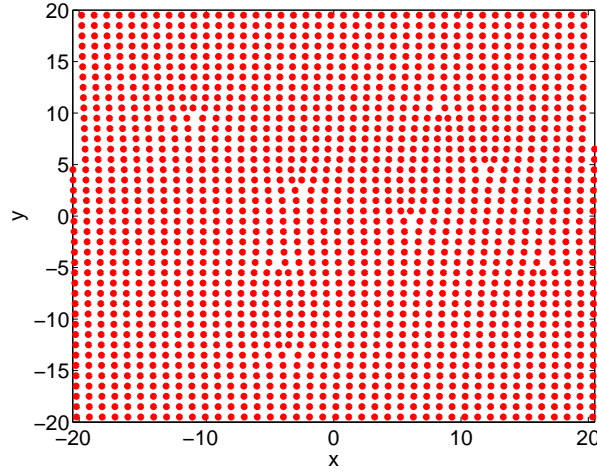


Figura 3: Dislocaciones en arista en interacción.

Para medir la magnitud de las reflexiones producidas por las condiciones de contorno artificiales se puede utilizar la norma infinito o la norma euclídea normalizada de la diferencia entre la solución obtenida con las condiciones de contorno artificiales y la solución calculada en un recinto varias veces mayor, que se toma como exacta. Otra posibilidad consiste en calcular el coeficiente de reflexividad:

$$R(t) = \frac{|E(t) - E_{app}(t)|}{E(0)} \quad (38)$$

donde  $E$  denota la energía de la solución exacta, y  $E_{app}$  la energía de la solución aproximada. Este coeficiente compara no sólo desplazamientos, sino también velocidades. La

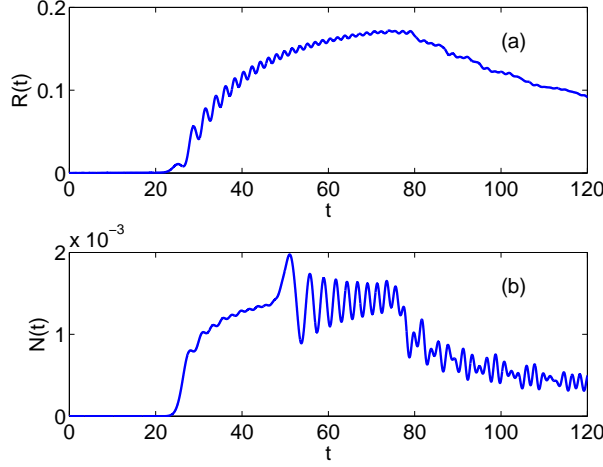


Figura 4: (a) Coeficiente de reflexividad para (31), (35) comparado con (b) la diferencia de normas euclídeas normalizada.

Figura 4 muestra la evolución del coeficiente de reflexividad en uno de nuestros experimentos.

Al superponer las condiciones de contorno en semiespacios para cada pared del recinto computacional, se pierde exactitud en las esquinas. El impacto de los posibles problemas en las esquinas decrece con el tamaño del recinto computacional.

### 3.2 Caso general

Al resolver (24) truncamos el dominio computacional a una caja finita, colocando fronteras artificiales en  $\{|n_1| = N_1, |n_2| = N_2, |n_3| = N_3\}$ , como en el caso anterior.

#### 3.2.1 Funciones de Green

Para calcular las funciones de Green del operador linealizado (24) seguimos el procedimiento de la Sección 3.1.1. Consideramos el problema de valores iniciales

$$M \frac{d^2 \mathbf{u}_n}{dt^2} = \sum_{|n_1 - n'_1| \leq 1, |n_2 - n'_2| \leq 1, |n_3 - n'_3| \leq 1} \mathbf{K}_{n-n'} \mathbf{u}_{n'} + \mathbf{f}_n, \quad (39)$$

$$\mathbf{u}_n(0) = \mathbf{u}_n^0, \quad \mathbf{u}'_n(0) = \mathbf{u}_n^1. \quad (40)$$

Ahora  $\mathbf{f}_n$  y  $\mathbf{u}_n$  son vectores y  $\mathbf{K}_n$  matrices. La transformada  $\mathbf{p}$  es solución del sistema

$$M \frac{d^2 \mathbf{p}}{dt^2}(\theta, t) + \mathbf{A}(\theta) \mathbf{p}(\theta, t) = \mathbf{f}(\theta, t), \quad \mathbf{A}(\theta) = \sum_{|\mathbf{n}_1| \leq 1, |\mathbf{n}_2| \leq 1, |\mathbf{n}_3| \leq 1} \mathbf{K}_n e^{-i\theta \cdot \mathbf{n}} \quad (41)$$

La matriz de coeficientes  $\mathbf{A}(\theta)$  no depende del tiempo. Para encontrar la solución general recurrimos a la transformada de Laplace en tiempo

$$L\mathbf{p}(\theta, s) = (Ms^2\mathbf{I} - \mathbf{A}(\theta))^{-1}(L\mathbf{f}(\theta, s) + M\frac{d\mathbf{p}}{dt}(\theta, 0) + sM\mathbf{p}(\theta, 0)). \quad (42)$$

Si  $LG_0(s) = (Ms^2\mathbf{I} - \mathbf{A}(\theta))^{-1}$  y  $LG_1(s) = s(Ms^2\mathbf{I} - \mathbf{A}(\theta))^{-1} = LG'_0(s)$ , al invertir la transformada de Laplace tenemos

$$\mathbf{p}(\theta, t) = M\frac{d\mathbf{G}_0}{dt}(t)\mathbf{p}(\theta, 0) + M\mathbf{G}_0(t)\frac{d\mathbf{p}}{dt}(\theta, 0) + \int_0^t \mathbf{G}_0(t-s)\mathbf{f}(\theta, s)ds, \quad (43)$$

y al invertir la transformada de Fourier discreta recobramos la expresión integral (9) con:

$$\mathbf{G}_{n,n'}^0(t) = M \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{(2\pi)^3} e^{i(\mathbf{n}-\mathbf{n}')\cdot\theta} \mathbf{G}_0(s)ds. \quad (44)$$

### 3.2.2 Condiciones de contorno

Una vez conocida la función de Green obtenemos la condición de contorno para un semiespacio. Si colocamos una frontera artificial en  $n_1 = 0$  y queremos resolver (24) cuando  $n_1 \geq 0$ , necesitamos una condición de contorno para calcular  $u_{0,\mathbf{m}}(t)$ ,  $\mathbf{m} = (n_2, n_3)$ . En la pared  $n_1 = 0$

$$M\frac{d^2\mathbf{u}_{0,\mathbf{m}}}{dt^2} = \sum_{|n'_1| \leq 1, |n_2-n'_2| \leq 1, |n_3-n'_3| \leq 1} \mathbf{K}_{(0,\mathbf{m})-\mathbf{n}'} \mathbf{u}_{\mathbf{n}'}. \quad (45)$$

Hemos de expresar los valores  $\mathbf{u}_{-1,\mathbf{m}'}$  en función de  $\mathbf{u}_{0,\mathbf{m}}$  para cerrar el sistema. Para ello, se trata de representar la contribución de la región  $n_1 \leq 0$  sobre la región  $n_1 \geq 0$  mediante fuerzas ejercidas sobre la interfaz.

Al aparecer términos cruzados en (39) no es cierto en general que la extensión impar  $\mathbf{v}$  de  $\mathbf{u}$  definida en (32) sea solución de un problema de tipo (39) con datos extendidos de forma impar a todo el espacio como en (32)-(34). Normalmente habrá que corregir  $\mathbf{g}_{n_1,\mathbf{m}}$ ,  $\mathbf{m} = (n_2, n_3)$ , en  $n_1 = 0$ :

$$\mathbf{g}_{n_1,\mathbf{m}} = \begin{cases} \mathbf{f}_{n_1,\mathbf{m}} + \delta_{n_1,-1}\mathbf{a}_{\mathbf{m}}(t) & n_1 < 0 \\ \mathbf{b}_{\mathbf{m}}(t) & n_1 = 0 \\ -\mathbf{g}_{-n_1,\mathbf{m}} & n_1 > 0 \end{cases} \quad (46)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{\mathbf{m}}(t) &= \sum_{|n_2-n'_2| \leq 1, |n_3-n'_3| \leq 1} \mathbf{K}_{(-1,\mathbf{m})-(0,\mathbf{m}')} \mathbf{u}_{0,\mathbf{m}'} \\ \mathbf{b}_{\mathbf{m}}(t) &= \sum_{|n_2-n'_2| \leq 1, |n_3-n'_3| \leq 1} [\mathbf{K}_{(0,\mathbf{m})-(-1,\mathbf{m}')} - \mathbf{K}_{(0,\mathbf{m})-(1,\mathbf{m}')}] \mathbf{u}_{-1,\mathbf{m}'}. \end{aligned} \quad (47)$$

Resolvemos el problema extendido en todo el espacio y obtenemos  $\mathbf{u}_{n_1, \mathbf{m}}$ ,  $n_1 < 0$ , en función de  $\mathbf{u}_{0, \mathbf{m}'}$ ,  $\mathbf{u}_{-1, \mathbf{m}'}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{n_1, \mathbf{m}}(t) &= \sum_{n'_1 \leq 0, \mathbf{m}' \in \mathbb{Z}^2} [\mathcal{G}_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'}^0(t) \frac{d\mathbf{u}_{\mathbf{n}'}}{dt}(0) + \frac{d\mathcal{G}_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'}^0}{dt}(t) \mathbf{u}_{\mathbf{n}'}(0)] \\ &+ \int_0^t \sum_{n'_1 \leq 0, \mathbf{m}' \in \mathbb{Z}^2} \mathcal{G}_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'}^0(t-s) \mathbf{f}_{\mathbf{n}'}(s) ds \\ &+ \int_0^t \sum_{\mathbf{m}' \in \mathbb{Z}^2} [\mathcal{G}_{\mathbf{n}, (-1, \mathbf{m}')}^0(t-s) \mathbf{a}_{\mathbf{m}'}(s) + \mathcal{G}_{\mathbf{n}, (0, \mathbf{m}')}^0(t-s) \mathbf{b}_{\mathbf{m}'}(s)] ds, \end{aligned} \quad (48)$$

donde  $\mathcal{G}_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'}^0$  es la función de Green en el semiespacio  $n_1 < 0$  con condición de contorno nula en el borde. Cuando  $\mathbf{K}_{(0+1, \mathbf{m}-\mathbf{m}')} = \mathbf{K}_{(0-1, \mathbf{m}-\mathbf{m}')}$ ,  $\mathbf{b}_{\mathbf{m}} = 0$  y (48) expresa  $\mathbf{u}_{-1, \mathbf{m}}$  en función de  $\mathbf{u}_{0, \mathbf{m}'}$ , con lo que se cierra (45) en  $n_1 \geq 0$ . Se tiene otra vez una condición de contorno con la estructura (31), (35)-(36). Si  $\mathbf{b}_{\mathbf{m}}$  no se anula, obtenemos una expresión para  $\mathbf{u}_{-2, \mathbf{m}}$  en función de  $\mathbf{u}_{0, \mathbf{m}'}$  y  $\mathbf{u}_{-1, \mathbf{m}'}$ . Esto nos permite cerrar la condición de contorno en  $\mathbf{u}_{-1, \mathbf{m}}$  en lugar de  $\mathbf{u}_{0, \mathbf{m}}$ :

$$M \frac{d^2 \mathbf{u}_{-1, \mathbf{m}}}{dt^2} = \sum_{|-1+n'_1| \leq 1, |n_2-n'_2| \leq 1, |n_3-n'_3| \leq 1} \mathbf{K}_{(-1, \mathbf{m})-\mathbf{n}'} \mathbf{u}_{\mathbf{n}'}. \quad (49)$$

con  $\mathbf{u}_{-2, \mathbf{m}'}$  dado por (48).

Estas condiciones se extienden a otros cristales cúbicos trabajando con la base de vectores primitivos y los planos de simetría del cristal. Un cuidadoso estudio numérico de su eficacia se lleva a cabo en [22].

#### 4 CAPAS PERFECTAMENTE ACOPLADAS

Conviene concluir con algunos comentarios sobre capas perfectamente acopladas, una idea que ha resultado bastante efectiva en algunos problemas continuos. La idea de capa perfectamente acoplada desarrollada en modelos continuos es la siguiente. Consideramos un sistema de la forma

$$\partial_t v - A \partial_x v - B \partial_y v = 0. \quad (50)$$

Introducimos un factor de disipación  $d(x)$  en la región  $x \geq 0$  y descomponemos  $u = u^{\parallel} + u^{\top}$ , donde  $\parallel$  denota la componente paralela a la interfaz  $x = 0$  y  $\top$  la componente perpendicular:

$$\partial_t u^{\parallel} - B \partial_y u = 0, \quad \partial_t u^{\top} - A \partial_x u = 0, \quad x < 0 \quad (51)$$

$$\partial_t u^{\parallel} - B \partial_y u = 0, \quad \partial_t u^{\top} + d(x) u^{\top} - A \partial_x u = 0, \quad x > 0. \quad (52)$$

Las soluciones de tipo onda plana de ambos sistemas son de la forma:

$$\begin{aligned} v &= v_0 e^{-i(k_x x + k_y y - \omega t)} \\ u^{\parallel} &= u_0^{\parallel} e^{-i(k_x x'(x) + k_y y - \omega t)}, u^{\top} = u_0^{\top} e^{-i(k_x x'(x) + k_y y - \omega t)} \\ a^{\parallel} + a^{\top} &= v_0, \quad a^{\parallel} = B v_0 \frac{k_y}{\omega}, a^{\top} = A v_0 \frac{k_x}{\omega} \end{aligned} \quad (53)$$

con  $x'(x) = x - i\omega \int_0^x d(s) ds$ . Resulta

$$u = v_0 e^{-i(k_x x + k_y y - \omega t)} e^{-\frac{k_x}{\omega} \int_0^x d(s) ds} \quad (54)$$

con lo que  $u$  coincide con  $v$  cuando  $x \leq 0$  pero se amortigua cuando  $x > 0$  con coeficiente  $\|u\| = \|v\| e^{-\frac{k_x}{\omega} \int_0^x d(s) ds}$ . Los dos sistemas se acoplan 'perfectamente' en la región  $x \leq 0$  y no hay reflexiones en la pared.

En la práctica es preciso introducir otra frontera artificial dentro de la capa acoplada infinita, a una cierta distancia de la primera pared y se imponen en ella condiciones de contorno nulas. Esta segunda frontera produce una reflexión pero como dentro de la capa acoplada las ondas decaen exponencialmente el coeficiente de reflexión decae rápido. Se incrementa el recinto computacional con esta región entre dos fronteras. Para que el coste sea menor que el generado por el cálculo de integrales en el borde es preciso que la franja a añadir se pueda elegir suficientemente estrecha. Por otra parte, al implementar el método hay que discretizar las ecuaciones. Las leyes de dispersión de los problemas discretizados no son las mismas que las de los problemas continuos y tampoco las ondas planas, por lo que al discretizar las capas pueden producirse reflexiones incontroladas y este método no siempre funciona en la práctica.

Construir capas perfectamente acopladas para problemas discretos en espacio no es sencillo, y los intentos en esa dirección son puramente heurísticos. Podemos obtener capas perfectamente acopladas aproximadas para el sistema (24) considerando su límite continuo, que es un problema elastodinámico anisótropo y discretizando sus capas. Los sistemas elastodinámicos se escriben en la forma (50) usando la formulación velocidad-tensión:  $\rho \frac{\partial v}{\partial t} - \text{div} \sigma = 0$ , y  $A \frac{\partial \sigma}{\partial t} - \varepsilon(v) = 0$ . Desafortunadamente, las capas resultantes son inestables, como se ve en [23, 24].

## 5 CONCLUSIONES

- Hemos propuesto condiciones de contorno no reflectantes para la simulación de la dinámica de defectos en cristales cúbicos simples en recintos computacionales reducidos.
- Estas condiciones se extienden a otros cristales cúbicos trabajando con la base de vectores primitivos y los planos de simetría del cristal [22].
- Las condiciones obtenidas son exactas, pero no locales en tiempo. La discretización de la integral puede dar lugar a inestabilidades a tiempos largos. Hemos intro-



ducido un esquema numérico que genera condiciones de contorno absorbentes para el problema discretizado y produce buenos resultados al simular geometrías simples.

- El diseño de capas perfectamente acopladas resulta complejo por la estructura espacial discreta. Cabría la posibilidad de recurrir a discretizaciones de las capas perfectamente acopladas para ecuaciones de elasticidad anisótropa, que, sin embargo, resultan ser inestables [23, 24]

**Agradecimientos.** Este trabajo ha sido financiado por los proyectos MAT2005-05730-C02-02, BSCH/UCM PR27/05-13939 y CM-910143.

## REFERENCIAS

- [1] K. Ohsawa, E. Kuramoto, Flexible boundary condition for a moving dislocation, *J. Appl. Phys.*, Vol. **86**, pp. 179-185, (1999).
- [2] F.F. Abraham, H. Gao, How fast can cracks propagate?, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. **84**, pp. 3113-3116, (2000).
- [3] J.Q. Broughton, F.F. Abraham, N. Bernstein, E. Kaxiras, Concurrent coupling of length scales: methodology and application, *Phys. Rev. B*, Vol. **60**, pp. 2391-2403, (1999).
- [4] B. Engquist, A. Majda, Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves, *Math. Comput.*, Vol. **31**, pp. 629-651, (1977).
- [5] B. Gustafsson, Far-field boundary conditions for time-dependent hyperbolic problems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, Vol. **9**, pp. 812-828, (1988).
- [6] M.J. Grote, J.B. Keller, On non-reflecting boundary conditions, *J. Comput. Phys.*, Vol. **122**, pp. 231-243, (1995).
- [7] B. Gustafsson, Inhomogeneous conditions at open boundaries for wave propagation problems, *Appl. Numer. Math.*, Vol. **4**, pp. 3-19, (1988).
- [8] L.N. Trefethen, L. Halpern, Well-posedness of one way wave equations and absorbing boundary conditions, *Math. Comput.*, Vol. **47**, pp. 421-435, (1986).
- [9] J.P. Berenger, A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves, *J. Comput. Phys.*, Vol. **114**, pp. 185-200, (1994).
- [10] F. Collino, C. Tsogka, Application of the PML absorbing layer model to the linear elastodynamic problem in anisotropic heterogeneous media, *Geophysics*, Vol. **66**, pp. 294-307, (2001).

- [11] R.L. Higdon, Absorbing boundary conditions for difference approximations to the multidimensional wave equation, *Math. Comput.*, Vol. **47**, pp. 437-459, (1986).
- [12] V.S. Ryaben'kii, S.V. Tsynkov, V.I. Turchaninov, Global discrete artificial boundary conditions for time-dependent wave propagation, *J. Comp. Phys.*, Vol. **174**, pp. 712-758 (2001).
- [13] W. Cai, M. Koning, V.V. Bulatov, S. Yip, Minimizing boundary reflections in coupled-domain simulations, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. **85**, pp. 3213-3216, (2000).
- [14] S.A. Adelman, J.D. Doll, Generalized Langevin equation approach for atom/solid-surface scattering: General formulation for classical scattering off harmonic solids, *J. Chem. Phys.*, Vol. **64**, pp. 2375-2388, (1976).
- [15] B.L. Holian, R. Ravelo, Fracture simulations using large scale molecular dynamics, *Phys. Rev. B*, Vol. **51**, pp. 11275-11288, (1995).
- [16] M. Moseler, J. Nordiek, H. Haberland, Reduction of the reflected pressure wave in the molecular-dynamics simulation of energetic particle-solid collisions, *Phys. Rev. B*, Vol. **56**, pp. 15439-15445, (1997).
- [17] W. E, Z. Huang, Matching conditions in atomistic-continuum modeling of materials, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. **85**, 135501, 1-4 (2001).
- [18] E. Schrodinger, The dynamics of elastically coupled point systems, *Annalen der Physik*, Vol. **44**, pp. 916-934, (1914).
- [19] J. Bafalui, J.M. Rubi, The harmonic liquid away from equilibrium I and II, *Physica A*, Vol. **153**, pp. 129-159, (1988).
- [20] A.I. Landau, Application of a model of interacting chains for the description of edge dislocations, *Phys. Stat. Sol. (b)*, Vol. **183**, 407-417, (1994).
- [21] A. Carpio, L.L. Bonilla, Discrete models for dislocations and their motion in cubic crystals, *Phys. Rev. B*, Vol. **12**, pp. 1087-1097, (2005).
- [22] A. Carpio, B. Tapiador, Nonreflecting boundary conditions for discrete waves, *J. Comp. Phys.*, 229, 1879-1896, (2010).
- [23] E. Beaches, S. Fauqueux, P. Joly, Stability of perfectly matched layers, group velocities and anisotropic waves, *J. Comp. Phys.*, Vol. **188**, 399-433, (2003).
- [24] A. Appeló, G. Kreiss, A new absorbing layer for elastic waves, *J. Comp. Phys.*, Vol. **215**, pp. 642-660, (2006).